

УТВЕРЖДАЮ

Директор Института

_____/_____/_____
“ ____ ” _____ 2023 г.

НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКОЕ ОБОСНОВАНИЕ ОТКРЫТИЯ ПРОЕКТА ПО НАПРАВЛЕНИЮ ИССЛЕДОВАНИЙ В ПРОБЛЕМНО-ТЕМАТИЧЕСКОМ ПЛАНЕ ОИЯИ

1. Общие сведения о проекте

1.1. Шифр темы

05-6-1119-2014/...

1.2. Шифр проекта

1.3. Лаборатория

ЛИТ

1.4. Научное направление

Сети, компьютеринг, вычислительная физика (05)

1.5. Наименование проекта

Методы вычислительной физики для исследования сложных систем

1.6. Руководители проекта

О. Чулуунбаатар, Е.В. Земляная

1.7. Заместители руководителя проекта

Ю.Л. Калиновский, А. Хведелидзе

2. Научное обоснование и организационная структура

2.1. Аннотация

Предлагаемый проект направлен на разработку и применение математических и вычислительных методов для моделирования сложных физических систем, изучаемых в рамках ПТП ОИЯИ и описываемых системами динамических нелинейных, пространственно неоднородных интегральных, интегро-дифференциальных или дифференциальных уравнений, зависящих от параметров моделей. Эволюция решений таких систем может характеризоваться наличием критических режимов, бифуркаций и фазовых переходов. Математическое моделирование является неотъемлемой частью современных научных исследований и требует адекватной математической постановки задач в рамках изучаемых моделей, адаптации известных и развития новых численных подходов для эффективного учета особенностей исследуемых физических процессов, разработки алгоритмов и комплексов программ для высокопроизводительного моделирования на современных вычислительных системах, включая ресурсы МИВК. Исследования в рамках проекта будут сосредоточены в следующих основных направлениях:

- I. Разработка методов, алгоритмов и комплексов программ для проведения численных исследований взаимодействий различных типов в сложных системах ядерной физики и квантовой механики.
- II. Моделирование многофакторных процессов в материалах и конденсированных средах под внешними воздействиями.

- III. Решение задач моделирования при проектировании экспериментальных установок и оптимизации режимов их работы.
- IV. Моделирование сложных процессов в плотной ядерной материи на основе уравнения состояния.
- V. Моделирование квантовых систем с применением методов квантовой теории информации и гибридных квантово-классических методов программирования.

В результате исследований, проведенных с использованием разработанных методов и комплексов программ, будет получена новая фундаментальная информация об изучаемых объектах, важная для дальнейшего развития математических моделей, теоретических и экспериментальных исследований.

2.2. Научное обоснование (цель, актуальность и научная новизна, методы и подходы, методика, ожидаемые результаты, риски)

Цель

Разработка и программная реализация вычислительных подходов для исследования методами математического моделирования физических явлений, находящихся в фокусе исследований Института в соответствии с Семилетним планом развития ОИЯИ на 2024–2030 гг.; получение на этой основе новых знаний, необходимых для понимания изучаемых физических процессов, дальнейших теоретических исследований и планирования экспериментальных проектов, актуальных с точки зрения перспективы практических приложений.

Основные направления исследований

Исследования проекта тесно связаны с широким спектром научных направлений в рамках Тематического плана ОИЯИ и нацелены на **создание новых математических методов, алгоритмов и программ для успешного решения актуальных задач**, возникающих в ходе реализации научных программ в ОИЯИ. Исследования в рамках проекта охватывают следующий круг задач.

I. Разработка методов, алгоритмов и комплексов программ для проведения численных исследований взаимодействий различных типов в сложных системах ядерной физики и квантовой механики, в том числе:

- исследование физических характеристик подбарьерных реакций слияния/деления тяжелых ядер на основе развития метода сильной связи каналов, потенциальных моделей атомных ядер и применения метода конечных элементов для высокоточной дискретной аппроксимации соответствующих систем уравнений;
- исследование процессов рассеяния тяжелых ионов и частиц на ядрах и взаимодействия тяжелых ионов в диапазоне средних энергий на основе моделей микроскопического оптического потенциала и в рамках транспортно-статистического подхода;
- моделирование химических связей и реакций с участием тяжелых и сверхтяжелых элементов с целью интерпретации результатов термохроматографических экспериментов, проводимых в ЛЯР;
- развитие методов и проведение исследования динамики спиновых ансамблей и холодных атомов в ловушках в рамках квантово-механических моделей.

II. Исследование многофакторных процессов в моделях сложных систем с внешними воздействиями, в том числе:

- моделирование физико-химических и структурных изменений в материалах под действием облучения заряженными частицами, нанокластерами или лазерного облучения; развитие методов расчета характеристик энергетических потерь тяжелыми ионами в облучаемом материале в широком диапазоне зарядового номера налетающих частиц и их относительных скоростей;

- моделирование сверхпроводящих процессов в джозефсоновских структурах различного типа; моделирование динамики спиновых систем в наноматериалах для исследования перспективы создания элементов памяти и передачи информации;
- исследование структуры и свойств полидисперсных фосфолипидных везикулярных систем различного типа, включая нанолечения, на основе молекулярно-динамических подходов и в рамках метода разделенных формфакторов;
- развитие методов и проведение моделирования сложных процессов в конденсированных средах с диссипацией и внешними воздействиями, описываемых нелинейными уравнениями теории поля.

III. Решение задач, возникающих при разработке и оптимизации режимов работы экспериментальных установок, в том числе:

- развитие методов численного решения систем уравнений, возникающих при моделировании физических полей;
- разработка и программная реализация алгоритмов, направленных на повышение эффективности и оптимизацию численного моделирования сложных магнитных систем ускорителей;
- проведение моделирования магнитных систем для экспериментальных установок, включая численное моделирование физических процессов при формировании магнитного поля циклотрона MSC230 (ЛЯП).

IV. Моделирование физических явлений на основе уравнения состояния плотной ядерной материи, в том числе:

- моделирование сложных процессов в горячей и плотной материи при соударениях тяжелых ионов в диапазоне энергий NICA, включая фазовые переходы с образованием кварк-глюонной плазмы;
- моделирование сложных процессов в астрофизических системах.

V. Разработка новых методов вычислительной физики, основанных на гибридном квантово-классическом программировании компьютерной математики, и их применение для исследования информационных характеристик квантовых состояний в физике элементарных частиц и ядер, квантовой химии и биофизике.

Несмотря на разнообразие заявленных задач, процесс разработки методов и проведения математического моделирования проводится в целом **по единой схеме**, охватывающей следующие этапы:

- Формулировка математической постановки задачи, корректно отражающей основные особенности изучаемой проблемы и цели исследования;
- Разработка вычислительного подхода к решению на основе комплексного применения методов вычислительной математики, символьно-численных и численно-аналитических алгоритмов, нейросетевых и молекулярно-динамических методов, методов квантовых вычислений и компьютерной алгебры, алгоритмов параллельных вычислений;
- Программная реализация разработанной вычислительной схемы с использованием средств программирования высокого и сверхвысокого уровня, технологий для организации параллельных и гибридных вычислений на современных высокопроизводительных вычислительных комплексах, с привлечением имеющихся библиотек компьютерных программ и проблемно-ориентированных пакетов программ, с применением специализированного инструментария для создания комфортной информационно-вычислительной среды для программирования и проведения расчетов;
- Проверка корректности разработанных методов и программ и верификация моделей на основе тестовых расчетов с варьируемыми вычислительными параметрами,

сопоставления численных результатов с имеющимися теоретическими оценками и экспериментальными данными;

- Проведение математического моделирования и получение в ходе анализа численных результатов новой информации о моделируемых физических системах, которые могут служить основой для уточнения и дальнейшего развития теоретических подходов и планирования экспериментов.

Исследования в рамках проекта предполагают развитие новых и совершенствование существующих, в том числе созданных участниками проекта, методов на каждом из перечисленных этапов. Тем самым, в ходе реализации проекта **будут разработаны новые методы, необходимые для успешного проведения основополагающих перспективных и опережающих исследований сложных физических явлений**, описываемых нелинейными многомерными многопараметрическими системами уравнений.

Результатом проекта будут:

- (1) оригинальные разработки в области развития методов вычислительной математики, высокопроизводительных вычислений и математического моделирования
- (2) полученные на этой основе новые физически значимые результаты.

I. Исследование сложных ядерно-физических и квантово-механических процессов

Данный раздел объединяет круг задач, связанных с численным исследованием характеристик ядерно-физических процессов, необходимых для понимания механизмов ядерных взаимодействий и структуры участвующих в реакциях ядер, проверки существующих теоретических гипотез, интерпретации получаемых экспериментальных данных, включая проводимые и планируемые эксперименты по синтезу сверхтяжелых элементов и по реакциям с участием легких экзотических ядер. Формулируемые постановки задач в большинстве основаны на принципах квантовой механики и требуют вычисления с высокой точностью решений многомерных уравнений Шредингера типа и соответствующих задач на собственные значения, решения нелинейных интегральных уравнений для расчета ядерных потенциалов, решения нелинейных динамических уравнений в рамках транспортно-статистического подхода, решения алгебраических систем высокого порядка. Исследования будут проводиться в сотрудничестве с ЛТФ и ЛЯР.

Одна из заявленных в рамках проекта задач – исследование физических характеристик глубоко подбарьерных реакций слияния/деления тяжелых ядер. В этом подходе исходная многоканальная задача рассеяния в осцилляторном представлении, учитывающем вибрационные и ротационные колебания поверхностей пары ионов, редуцируется к системе обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка с асимптотическими краевыми условиями при больших и малых значениях радиальной переменной относительно движения сталкивающихся ионов. В рамках метода связи каналов будет разработан комплекс программ, реализующий в условиях сильной связи расчет матричных элементов и численное решение соответствующей системы уравнений Шредингера с недиагональными краевыми условиями, а также расчет сечений реакций слияния и деления тяжелых ядер при энергиях существенно ниже кулоновского барьера. За основу будет взят разработанный авторами проекта пакет KANTBP 3.1¹, реализующий устойчивые вычислительные схемы высокого порядка точности на основе метода конечных элементов. Данная программа успешно использовалась для расчета сечений слияния

¹ O. Chuluunbaatar, A.A. Gusev, S.I. Vinitsky, A.G. Abrashkevich, P.W. Wen, C.J. Lin, Comput. Phys. Commun. 278, 108397–1–14 (2022).

тяжелых ионов $^{12}\text{C}+^{12}\text{C}$, $^{64}\text{Ni}+^{64}\text{Ni}$, $^{64}\text{Ni}+^{100}\text{Mo}$, $^{28}\text{Si}+^{64}\text{Ni}$, $^{36}\text{S}+^{48}\text{Ca}$ ². На рис.1 представлены некоторые результаты из ², подтверждающие более высокую точность и лучшее согласие с экспериментальными данными по сравнению с другими методами. Перспективность предложенного подхода для понимания процессов образования сверхтяжелых элементов, отмечена, в частности, в обзоре ³.

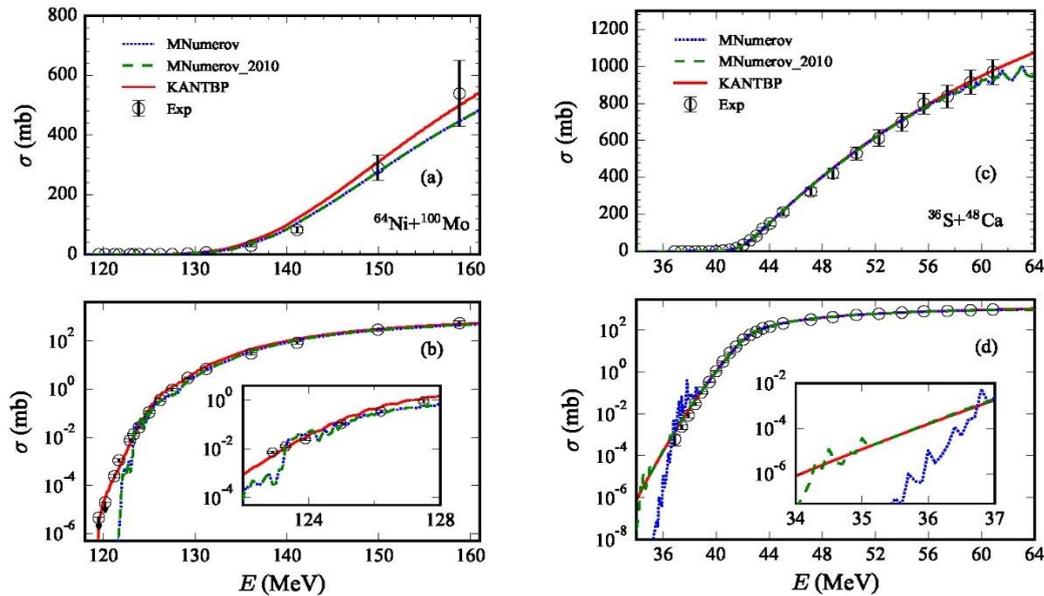


Рис. 1. Сечения слияния $^{64}\text{Ni}+^{100}\text{Mo}$ и $^{36}\text{S}+^{48}\text{Ca}$ (a,c) в линейной шкале и (b,d) в логарифмической шкале в сравнении с экспериментальными данными, рассчитанные с помощью модифицированного метода Нумерова, реализованного в программе CCFULL [К. Hagino, et al, CPC 123 (1999) 143] (синий пунктир) и обновленной в 2010г. версии этой программы (штриховые зеленые кривые), а также на основе пакета KANTBP ¹ (сплошные красные кривые).

Еще одной задачей проекта, связанной с исследованием сверхтяжелых элементов, является построение стохастической модели химических реакций с участием тяжелых и сверхтяжелых элементов для интерпретации данных экспериментов ЛЯР по термохроматографии. Модель основана на применении методов электронной теории функционала плотности с использованием различных обменно-корреляционных потенциалов, методов статистической физики и химической кинетики и описывается численно решаемыми системами дифференциальных уравнений в частных производных при различных начальных и граничных условиях. На этой основе планируется получение методами математического моделирования уточненной и новой информации о характеристиках ядер, участвующих в планируемых экспериментах по синтезу сверхтяжелых элементов, об электронной структуре и химических связях в сверхтяжелых атомах, о влиянии релятивистских эффектов на эти характеристики.

В рамках проекта планируются исследования характеристик ядро-ядерных взаимодействий, включая реакции с участием легких и тяжелых ядер с нейтронным гало, что на основе совместного анализа численных и экспериментальных результатов позволит получить новую информацию о структуре таких ядер. В этих исследованиях будет использована разработанная участниками параллельная программная реализация метода расчета микроскопического оптического потенциала в рамках модели двойной свертки ⁴ (программа передана в библиотеку JINRLIB). Модель микроскопического потенциала

² P.W. Wen, O. Chuluunbaatar, A.A. Gusev, R.G. Nazmitdinov, A.K. Nasirov, S.I. Vinitsky, C.J. Lin, H.M. Jia, Phys. Rev. C **101**, 014618–1–10 (2020); P.W. Wen, C.J. Lin, R.G. Nazmitdinov, S.I. Vinitsky, O. Chuluunbaatar, A.A. Gusev, A.K. Nasirov, H.M. Jia, A. Gózdź, Phys. Rev. C **103**, 054601–1–6 (2021).

³ C.L. Jiang et al, Eur. Phys. J. A **57**, 235–1–47 (2021).

⁴ M. Bashashin, E. Zemlyanaya, K. Lukyanov, European Phys. J. Web of Conf. **226**, 02002 (2020).

будет существенно модернизирована для расширения спектра энергий и типов реакций. На этой основе планируются исследования характеристик ядро-ядерных взаимодействий в широком диапазоне энергий и атомных номеров сталкивающихся ядер. Также, разработанная на основе микроскопической модели оптического потенциала методика⁵ для исследования характеристик пион-ядерного рассеяния будет адаптирована и применена для анализа влияния ядерной среды на амплитуду протон-нуклонного рассеяния.

С целью повышения точности и сокращения времени счета будут существенно модернизированы методы и программы, реализующие транспортно-статистическую модель для расчета физических характеристик взаимодействий тяжелых ионов при средних энергиях⁶. Уточнение вычислительных и физических параметров будет проводиться на основе сопоставления с имеющимися экспериментальными данными и теоретическими оценками. Исследование будет проводиться в сотрудничестве с коллегами из ЛЯР. С использованием разработанных подходов будет получено реалистичное описание изотопных и скоростных распределений в реакциях фрагментации тяжелых ионов при средних энергиях.

Моделирование динамики спиновых ансамблей и холодных атомов в ловушках будет проводиться на основе численного решения сформулированных нелинейных интегро-дифференциальных уравнений и применения метода самосогласованных автомодельных приближений, оптимизированного для решения нелинейных уравнений, не содержащих малых параметров⁷. Разработанные методы и программы обеспечат получение новых численных результатов по моделированию динамики спиновых систем и холодных атомов в ловушках, актуальных с точки зрения перспективы технологических приложений.

II. Исследование многофакторных процессов в моделях сложных систем с внешними воздействиями

Численное исследование многофакторных процессов в материалах и конденсированных средах под внешними воздействиями, как правило, сводится к массовым расчетам по численному решению систем нелинейных уравнений различного типа в широком диапазоне параметров моделей, при этом на уровне математической формулировки задачи требуется учет таких особенностей моделируемых процессов как фазовые переходы, множественность решений, возможные бифуркации и критические режимы. Для решения поставленных задач будут существенно модернизированы имеющиеся и разработаны новые вычислительные схемы для проведения математического моделирования на основе комбинированного использования различных численных методов, сочетания аналитических и численных методов, широкого применения параллельных вычислений.

Одной из основных задач проекта в этом направлении является исследование методами математического моделирования сложных процессов в материалах под действием облучения заряженными частицами высоких энергий. Актуальность таких исследований обусловлена перспективами развития методов целенаправленного изменения свойств материалов, а также необходимостью исследования устойчивости материалов к различным видам облучения. Пример моделирования динамики изменений в материале под действием облучения на основе разработанных участниками проекта подходов⁸ показан на рис. 2.

⁵ V.K. Lukyanov, E.V. Zemlyanaya, K.V. Lukyanov, I. Abdul-Magead, Nucl. Phys. A **1010**, 122190 (2021).

⁶ T.I. Mikhailova, B. Erdemchimeg, A.G. Artukh, M. Di Toro, H.H. Wolter, Acta Phys. Polon. Supp. **12**, 3, 619–628 (2019).

⁷ V.I. Yukalov, E.P. Yukalova, Intern. J. Mod. Phys. **B 34** 2050208-13 (2020).

⁸ И.В. Пузынин, Т.П. Пузынина, И.Г. Христов, Р.Д. Христова, З.К. Тухлиев, З.А. Шарипов, Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, **12**, 78–82 (2020); З.А. Шарипов, Б. Батгэрэл, И.В. Пузынин, Т.П. Пузынина, И.Г. Христов, Р.Д. Христова, З.К. Тухлиев, Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования, **8**, 19–24 (2022).

Для проведения математического моделирования планируется разработка и использование вычислительных схем на основе комбинированного континуально-атомистического подхода, сочетающего преимущества моделей на основе уравнений сплошных сред с моделями, описываемыми системами уравнений движения частиц⁹. Будут созданы вычислительные схемы и комплекс программ для численного решения соответствующих систем уравнений. Методами математического моделирования будут получены новые результаты по исследованию динамики дефектных структур в металлических мишенях под действием облучения при разных энергиях облучающего пучка. В том числе, будут найдены пороговые значения энергии облучения, приводящие к изменениям дефектных структур мишени, будут разработаны методы расчета средних распределений энергетических потерь тяжелыми ионами в облучаемых материалах с учетом моттовских поправок, обеспечивающие согласие расчетных характеристик с имеющимися экспериментальными данными.

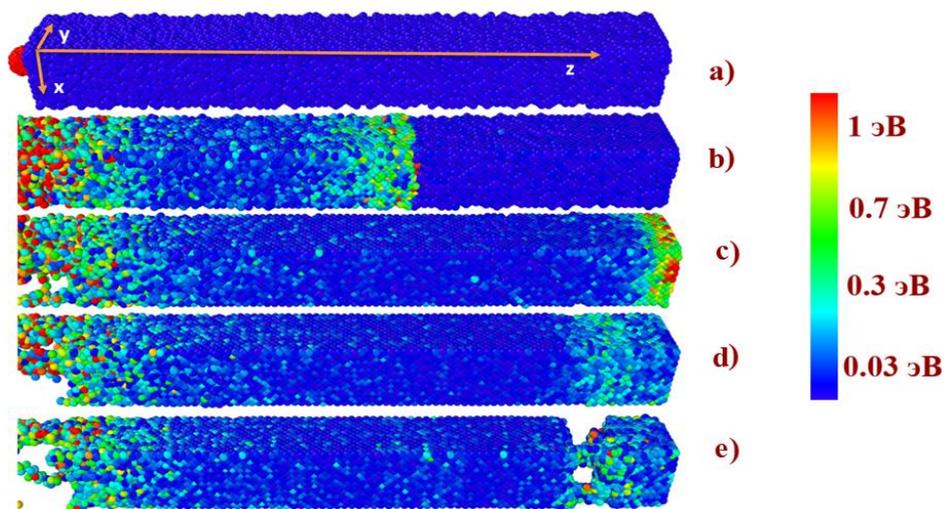


Рис. 2. Динамика ударной волны с образованием дефектов в глубине медной мишени при облучении нанокластером, состоящим из атомов меди с энергией 100 эВ/атом, в моменты времени 1 пс (a), 4 пс (b), 7 пс (c), 10 пс (d) и 15 пс (e). Рисунок из Изв. РАН, сер. физ. Т.83, №10, 2019, 130б.

Исследование сверхпроводящих процессов в джозефсоновских и спиновых наноструктурах в зависимости от конфигурации изучаемых систем и характера внешнего воздействия относится к традиционному направлению исследований в НОВФ ЛИТ, которое проводится в сотрудничестве с коллегами из ЛТФ¹⁰. Активный интерес исследователей к данной тематике связан с перспективами создания на этой основе элементов памяти и передачи информации. Соответствующие математические модели описываются начально-краевыми задачами для систем нелинейных дифференциальных уравнений в частных производных с большим количеством параметров. Численное исследование подразумевает разработку и сравнительное тестирование вычислительных схем с целью выбора численных подходов, устойчивых к ошибкам округления¹¹, а также реализацию параллелизма для проведения высокопроизводительного компьютерного моделирования в широком диапазоне параметров моделей с целью изучения влияния различных факторов на динамику сверхпроводящих процессов.

¹⁰ И.Р. Рахмонов, Ю.М. Шукринов, П.Х. Атанасова, Е.В. Земляная, М.В. Башашин, ЖЭТФ **151**, 10, 151–159 (2017); П.Х. Атанасова, С.А. Панайотова, И.Р. Рахмонов, Ю.М. Шукринов, Е.В. Земляная, М.В. Башашин, Письма в ЖЭТФ **110**, 11, 736–740 (2019).

¹¹ М.И. Зуев, С.И. Сердюкова, ЖВМиМФ **62**, 1, 3–11 (2022).

В этих исследованиях для повышения эффективности работ по созданию компьютерных программ и проведению вычислений планируется разработка и использование информационно-вычислительной среды на базе JupyterHub, предоставляющей широкие возможности для организации расчетов с визуализацией всех этапов моделирования при решении поставленных задач. В результате выполнения проекта будет создана информационно-вычислительная среда¹², включающая в себя разработанные алгоритмы и программные модули, адаптированные для выполнения численного моделирования сверхпроводящих систем с магнетиком, позволяющая эффективно проводить исследования сверхпроводящих элементов в наноразмерных структурах с магнетиками. В результате проведенных на этой основе исследований будут получены новые результаты, актуальные для понимания механизмов физических процессов в моделируемых наноструктурах.

Исследование структуры и динамики эволюции фосфолипидных мембран в везикулярных и бицеллярных системах имеет важное значение для понимания фундаментальных биохимических процессов в живых организмах, а также для получения информации, практически важной для разработки и повышения эффективности лекарственных препаратов. Исследования в этом направлении будут проводиться на основе молекулярно-динамических подходов с применением пакета GROMACS на гетерогенной вычислительной платформе HugiLIT. Эти подходы уже использованы для исследований, проведенных в сотрудничестве с ЛНФ¹³. На рис. 3 слева представлен полученный методом молекулярной динамики результат формирования везикул на основе ДПФХ и бета-амилоидных пептидов. В дальнейшем предполагается реализация таких расчетов на графических ускорителях для получения как можно более длительного времени эволюции системы за разумное время. Также, исследования везикулярных систем различного типа в зависимости от температуры и химического состава среды будут проводиться на основе метода разделенных формфакторов¹⁴ с использованием разных подходов для моделирования фосфолипидного бислоя. В качестве критерия для верификации моделей и выбора параметров будут использоваться экспериментальные данные малоуглового рассеяния нейтронов и рентгеновских лучей.

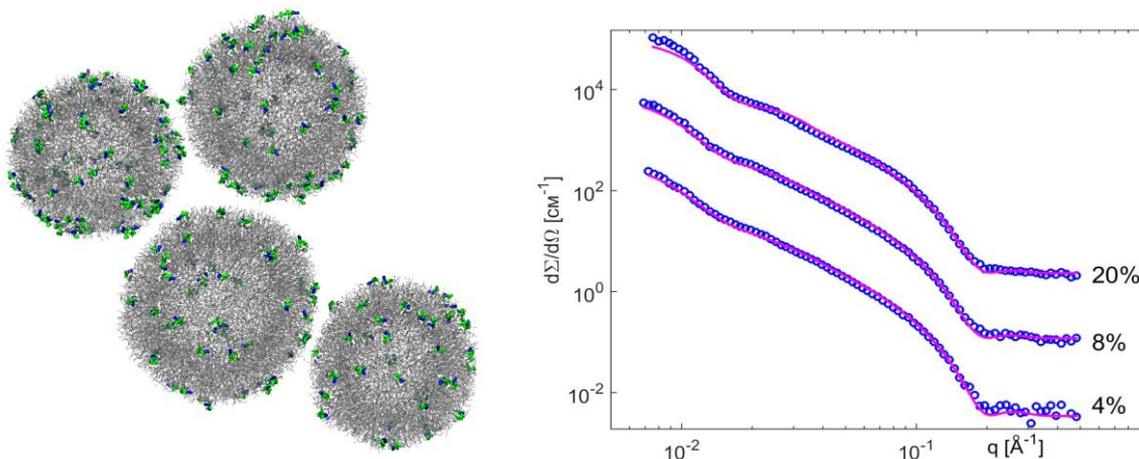


Рис. 3. Слева: расчет на основе молекулярно-динамического подхода – результат самоорганизации везикул ДПФХ из случайно распределенных липидов ДПФХ и бета-амилоидных пептидов при температуре выше температуры основного фазового перехода липида ДПФХ. Справа: рассчитанные в рамках модели разделенных форм-факторов сечения малоуглового рассеяния

¹² Ю.А. Бутенко, Д.М. Маров, А.В. Нечаевский, О.И. Стрельцова, И.Р. Рахмонов, М. В. Башашин, Современные информационные технологии и ИТ-образование **16**, 3, 633–642 (2020).

¹³ O. Ivankov, T.N. Murugova, E.V. Ermakova, T. Kondela, D.R. Badreeva et al. Scientific Reports **11**, 21990 (2021).

¹⁴ М.А. Киселев, Е.В. Земляная, Е.И. Жабицкая, М.В. Башашин, А.И. Иванов, Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования **17**, 1, 3–9 (2023).

нейтронов на везикулярной системе лекарства «индолип» в сравнении с экспериментальными данными, полученными в ЛНФ на малоугловом спектрометре ЮМО.

Моделирование сложных процессов в конденсированных средах, описываемых нелинейными уравнениями теории поля, требует применения методов продолжения по параметрам с идентификацией бифуркаций и выходом на новые ветви решений, повышения точности дискретной аппроксимации в вычислительных схемах для обеспечения надежности получаемых численных результатов, применения параллелизма для ускорения массовых расчетов в широком диапазоне параметров моделей. Будут разработаны методы и проведено исследование нелинейных процессов формирования локализованных структур в конденсированных средах с диссипацией и внешними воздействиями, описываемых различными типами уравнений теории поля. В том числе, будут продолжены исследования процессов формирования гидратированного электрона в рамках подхода, определяемого динамической моделью полярона. Результаты численного исследования этой модели отражены в обзоре ¹⁵ и вошли в кандидатскую диссертацию А.В. Волоховой, успешная защита которой прошла в ЛИТ в 2022 г. В рамках проекта планируется существенная модернизация модели, которая потребует новой математической постановки задачи, разработки новой вычислительной схемы и комплекса программ для исследования влияния различных факторов на процесс гидратации электронов и поведение наблюдаемых характеристик этого процесса.

III. Решение задач, возникающих при разработке и оптимизации режимов работы экспериментальных установок

При проектировании и эксплуатации экспериментальных установок возникает целый ряд задач, требующих надежного численного решения. Среди них нужно отметить прежде всего численное моделирование сложных магнитных систем ускорителей ¹⁶. Достоверный расчет многочисленных характеристик магнитных полей, необходимых при подготовке новых конфигураций экспериментальных установок, предъявляет высокие требования к корректности математических формулировок задачи, робастности используемых численных подходов, высокой точности и производительности вычислений.

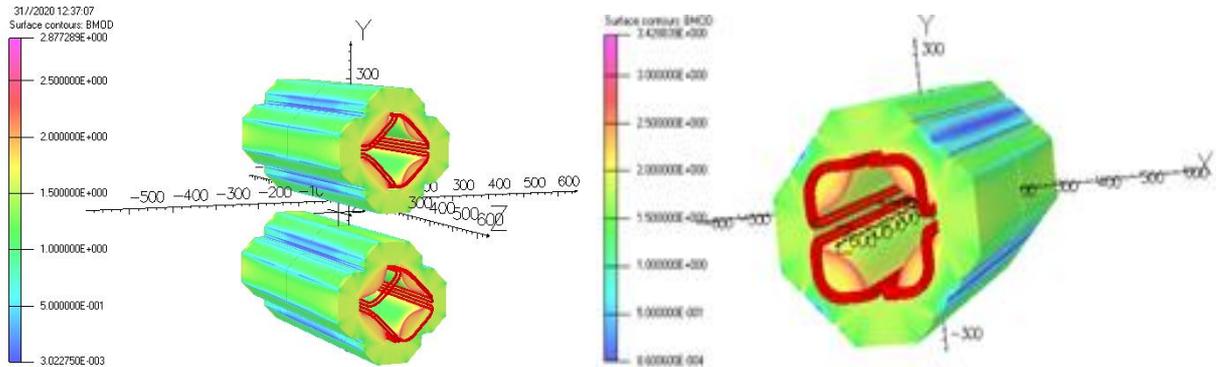


Рис. 4. Расчеты распределений магнитного поля в системах коллайдера NICA для квадрупольного магнита (слева) и линзы финального фокуса (справа).

Данное направление также является традиционным для сотрудников отдела НОВФ ЛИТ. В числе достижений участников проекта – проведенное компьютерное моделирование магнитных систем, включая дипольные и квадрупольные сверхпроводящие магниты коллайдера и бустера проекта NICA ОИЯИ, дипольные и квадрупольные сверхпроводящие магниты ускорителя SIS100 FAIR и магнитную систему эксперимента CBM FAIR (GSI,

¹⁵ В.Д. Лахно, И.В. Амирханов, А.В. Волохова, Е.В. Земляная, И.В. Пузынин, Т.П. Пузынина, В.С. Рихвицкий, М.В. Башашин, Физика элементарных частиц и атомного ядра, принято к публикации 21.03.2023.

¹⁶ P.G. Akishin, V.P. Ladygin, Physics of Particles and Nuclei Letters **19**, 6, 785–788 (2022).

Дармштадт), магнитную систему циклотрона MSC230 (ЛЯП) и др. Примеры расчетов магнитного поля квадрупольного магнита и линзы финального фокуса коллайдера NICA показаны на рис. 4. Отметим, что в 2020г. в диссертационном совете ЛИТ прошла успешная защита кандидатских диссертаций А.С. Айрияна и А.А. Сапожникова, тематика которых связана с моделированием сложных процессов в крупных экспериментальных установках.

При решении задач, возникающих при разработке и оптимизации режимов работы экспериментальных установок, необходимо обеспечить качественную дискретизацию математических уравнений, эффективное численное решение возникающих нелинейных уравнений. Для получения достоверных результатов необходимо уменьшать ячейки дискретных сеток, что приводит к очень большим размерностям решаемых систем нелинейных уравнений и, как следствие, к значительному увеличению времени расчета. В этой связи необходима оптимизация на всех этапах вычислений и разработка параллельных алгоритмов для эффективного использования высокопроизводительных вычислительных ресурсов, включая ресурсы МИВК.

В рамках проекта будут разработаны и протестированы смешанные формулировки задач магнитостатики на основе магнитного векторного и полного скалярного потенциалов, будет проведена адаптация и тестирование комбинированного метода конечных и граничных элементов для 3D моделирования магнитных систем со сложной геометрией и нелинейной намагниченностью. Будут развиты численные методы моделирования магнитных систем в рамках интегральной постановки с использованием объемных интегральных уравнений с кусочно-полиномиальной аппроксимацией намагниченности в пределах конечного элемента.

Будут развиты методы, направленные на повышение эффективности и оптимизацию численного моделирования сложных магнитных систем ускорителей на основе методов конечных и граничных элементов, включая разработку масштабируемых алгоритмов с высоким потенциалом параллелизма. Планируется адаптация разработанных алгоритмов в рамках пакета COMSOL Multiphysics® на ресурсах вычислительного комплекса МИВК.

Будет проведена доработка и оптимизация программы CORD (Closed ORbit Dynamics)¹⁷ и с ее помощью в сотрудничестве с коллегами из ЛЯП будет проведен анализ частот бетатронных колебаний и фазового движения частиц в различных вариантах компьютерных моделей и при формировании магнитного поля циклотрона MSC230 (ЛЯП). Планируется оформление программы CORD и подготовка ее описания для размещения в библиотеке JINRLIB.

IV. Моделирование физических явлений на основе уравнения состояния плотной ядерной материи

Продвижение вперед в области изучения фундаментальных свойств ядерной материи при экстремальных плотностях требует создания надежных вычислительных методов, реализующих разрабатываемые теоретико-феноменологические подходы для моделирования сложных процессов и фазовых переходов в сверхплотном ядерном веществе, возникающих при соударениях тяжелых ионов в области энергий NICA.

Для проведения численного моделирования физических явлений на основе уравнения состояния плотной ядерной материи будут сформулированы математические постановки задач для нелинейных дифференциальных уравнений, описывающие сложные процессы в астрофизических системах¹⁸ и при столкновениях тяжелых ионов в экспериментальных

¹⁷ O. Karamyshev, T. Karamysheva, I. Lyapin, V. Malinin, D. Popov, *Physics of Particles and Nuclei Letters* **18**, 4, 481–487 (2021).

¹⁸ M. Shahrbaф, S. Antić, A. Ayriyan, D. Blaschke, A.G. Grunfeld, *Phys. Rev. D* **107**, 054011 (2023); A. Ayriyan, D. Blaschke, A.G. Grunfeld, D. Alvarez-Castillo, H. Grigorian, V. Abgaryan, *Eur. Phys. J. A* **57**, 318 (2021).

условиях ¹⁹, учитывающие такие особенности моделируемых систем как возможность изменения фазового состояния ядерной материи, кратковременность изучаемых процессов, необходимость учета температурных эффектов.

Численное моделирование потребует привлечения традиционного аппарата итерационных и сеточных методов решения нелинейных дифференциальных и интегральных уравнений, а также развития нейросетевых алгоритмов как для решения дифференциальных уравнений, так и для вычисления многомерных интегралов, возникающих при описании процессов рассеяния и рождения частиц в плотной и горячей ядерной материи. Будут разработаны методы верификации результатов компьютерного моделирования на основе использования данных наблюдений за компактными звёздами и экспериментальных данных по соударениям тяжелых ионов, реализующие байесовские методы для оценки свободных параметров моделируемых процессов и моделей уравнения состояния сверхплотной материи. Примеры расчетов в данном направлении на основе развиваемых участниками проекта подходов представлены на рис. 5.

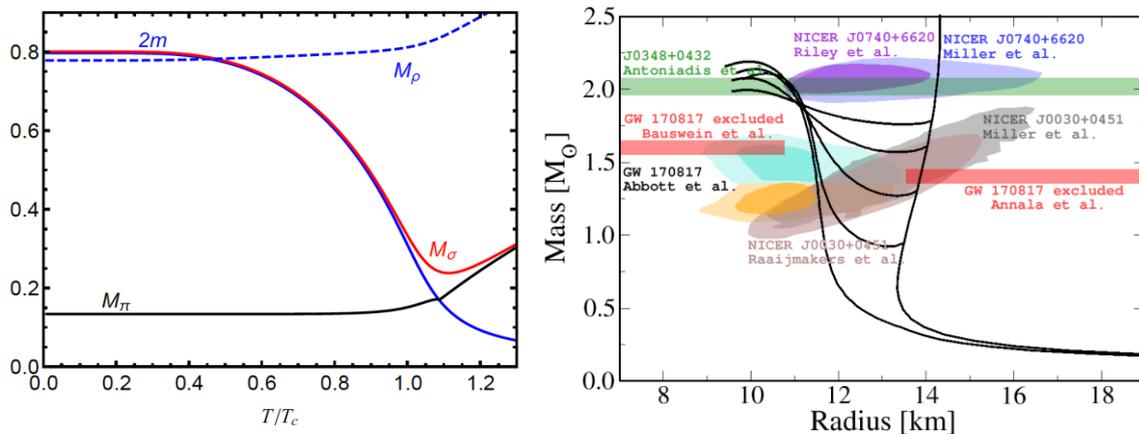


Рис. 5. Слева: температурная зависимость $M_i(T)$ спектра масс мезонов ($i = \pi, \sigma, \rho$) и двойной массы кварка $m(T)$ в плотной ядерной материи (рисунок из ¹⁹); справа: диаграмма соотношений массы и радиуса нейтронных звезд для различных моделей уравнения состояния сверхплотной ядерной материи в сопоставлении с данными многоканальной астрономии, включая сигналы гравитационных волн от слияния нейтронных звезд.

Будут созданы методы и программы для моделирования процессов в сильно взаимодействующей горячей и плотной ядерной материи, возникающей в соударениях тяжелых ионов при энергиях NICA, включая процессы рассеяния и рождения частиц и образование кварк-глюонной плазмы. Численные результаты, полученные на основе разработанных методов и программ внесут существенный вклад в понимание фундаментальных процессов в моделируемых системах. Будет разработан и реализован метод верификации моделей уравнения состояния сверхплотной ядерной материи по данным многоканальной астрономии. Разработанное и существующее программное обеспечение будет интегрировано в единую информационно-вычислительную систему для унифицированной работы с разными моделями уравнения состояния, включая проведение интерактивных расчетов механических характеристик нейтронных звезд на основе уравнения состояния холодного и плотного вещества.

¹⁹ D. Goderidze, A. Friesen, Yu. Kalinovsky, Intern. J. Modern Physics A **37**, 22, 2250135 (2022); A. Friesen, D. Goderidze, Yu. Kalinovsky, Physics of Particles and Nuclei Letters, **19**, 4, 412–421 (2022), А.В. Фризен, Д. Годеридзе, Ю.Л. Калиновский, Письма в ЭЧАЯ **19**, 4(243), 337 (2022); D. Blaschke, A. Friesen, Yu. Kalinovsky, Symmetry **15**, 117 (2023).

V. Моделирование квантовых систем с применением методов квантовой теории информации и гибридных квантово-классических методов программирования

Современный прогресс квантовых технологий, обусловленный синтезом знаний фундаментальных закономерностей микромира и решением нетривиальных инженерно-технических задач, послужил сильнейшей мотивацией создания нового раздела науки — квантовой информатики. В свою очередь достижения последней связаны со становлением новых направлений вычислительной физики и компьютерной математики, в основу которой положены базовые принципы квантовой теории. Многофакторное описание квантовых систем в рамках квантовой информатики подразумевает наряду со стандартным набором физических характеристик использование также статистически-информационных величин (энтропии, показатели корреляции и запутанности квантовых состояний и т.д.)²⁰, является необходимым для эффективного развития квантовых информационных технологий.

Для решения задач квантового моделирования будут использованы методы компьютерной алгебры, символьно-численные алгоритмы²¹ в сочетании с развиваемым в ЛИТ формализмом описания квантовых систем в фазовом пространстве в терминах квази-вероятностных распределений²². Также, для решения эволюционных задач в квантовых системах предполагается применение теории алгебр и групп Ли в синтезе с известными квантово-классическими алгоритмами квантовых вычислений. Будут созданы новые методы квантового моделирования процессов хранения и передачи информации в открытых и закрытых квантовых системах с учетом их информационного ресурса. На основе применения гибридных квантово-классических схем программирования планируется оптимизация существующих классических симуляторов и создание новых, позволяющих уменьшить требуемые вычислительные мощности за счет создания новых эффективных методов и программ с ориентацией на гетерогенную платформу HybriLIT.

Ожидаемые результаты на первый год реализации проекта

По разделу I.

Разработка математической постановки задачи в рамках метода сильной связи каналов с оптическим потенциалом Вудса–Саксона и регулярными граничными условиями для моделирования подбарьерных реакций слияния и деления тяжелых ионов.

Разработка методов и проведение расчетов энергии адсорбции на слое Au тяжелых и сверхтяжелых атомов; подготовка публикации.

Развитие и оптимизация метода автомодельных приближений для решения нелинейных уравнений, не содержащих малых параметров и описывающих квантово-механические системы, включая спиновые ансамбли и холодные атомы в ловушках. Подготовка публикаций по этой тематике.

Разработка метода и программы, иницирующей в рамках транспортно-статистического подхода начальное состояние сталкивающихся ядер с ядерными потенциалами, которые используются для дальнейшего расчета динамики столкновений.

Моделирование протон-ядерных взаимодействий на основе микроскопической модели оптического потенциала в широком диапазоне энергий и атомных номеров ядер-мишеней для исследования влияния ядерной среды на процессы рассеяния протонов на внутриядерных нуклонах; подготовка публикации.

По разделу II.

²⁰ V. Abgaryan, A. Khvedelidze, A. Torosyan, Physics Letters A **412**, 7, 127591 (2021)

²¹ В.В. Корняк, Программирование, 2, 34–43 (2021); O.V. Tarasov, Journal of High Energy Physics **6**, 155–205 (2022).

²² V. Abgaryan, A. Khvedelidze, Symmetry **13**, 6, 1013 (2021).

Исследование динамики ударной волны в облучаемом материале на основе модели, описываемой комбинацией уравнений молекулярной динамики, уравнений теплопроводности и волновых уравнений. Определение параметров волнового уравнения по результатам численного решения молекулярно-динамических уравнений. Разработка и программная реализация методов оценки разброса потерь энергии тяжелых заряженных частиц в материалах за счет больших передач импульса. Исследование и классификация изменений дефектных структур в рамках молекулярно-динамического подхода под действием различных видов облучения в зависимости от его энергии.

Моделирование взаимодействия бета-амилоидных и антимикробных пептидов с фосфолипидными мембранами в везикулярных и бицеллярных структурах в рамках крупнозернистой модели; исследование динамических свойств данного взаимодействия на основе расчета фононных спектров систем; построение профиля свободной энергии процесса вытягивания пептида из мембраны в зависимости от расстояния между центрами масс и конформацией пептида (replica exchange umbrella sampling).

Исследование локализованных структур в системах, описываемых нелинейным уравнением Дирака с параметрической накачкой и диссипацией. Исследование процессов формирования гидратированного электрона на основе модифицированной поляронной модели, учитывающей кулоновское взаимодействие, расчет наблюдаемых характеристик этого процесса.

По разделу III.

Адаптация пакета COMSOL Multiphysics® на гетерогенной платформе HybriLIT вычислительного комплекса МИВК с целью повышения эффективности расчётов и уменьшения затрат вычислительных ресурсов за счет использования смешанной векторно-скалярной формулировки магнитостатики и гибридного метода конечных и граничных элементов.

Разработка и программная реализация разностных схем для решения краевой задачи для уравнения 4-го порядка, описывающих распределение физических полей в 2D и 3D областях различных конфигураций.

Разработка методов и исследование формирования магнитных полей изохронных циклотронов при различных режимах работы. Подготовка инструкции и оформление для передачи в библиотеку JINRLIB программы CORD (Closed ORbit Dynamics), реализующей расчеты по исследованию влияния бетатронных колебаний и фазового движения частиц пучка на магнитное поле циклотрона MSC230.

По разделу IV.

Адаптация нейросетевого подхода к приближенному вычислению многократных интегралов, возникающих при исследовании выживаемости пионов в соударениях тяжелых ионов; исследование методов обобщения разработанной ранее модели кварк-адронного фазового перехода в холодной ядерной материи на конечные температуры.

Моделирование и расчет значений космологического красного смещения на основе уравнения состояния; исследование возможности восстановления спектра масс изолированных нейтронных звезд по данным о возрасте и поверхностной температуре пульсаров на основе моделирования их температурной эволюции; моделирование процессов рассеяния и рождения частиц в плотной и горячей ядерной материи; подготовка публикаций.

По разделу V.

Разработка алгоритма троттеризации оператора эволюции для уравнений фон Неймана и Линдблада и реализация соответствующей квантовой схемы на квантовом симуляторе в среде QISKit. Повышение производительности симулятора квантовой схемы за счет увеличения скорости симуляции используя многопроцессорность.

Создание пакета модулей, предназначенных для разложения квантовой системы на подсистемы на основе применения тензорных произведений представлений сплетений конечных циклических групп.

Определение взаимосвязи характеристик запутанности составных квантовых систем и отрицательности квазивероятностных распределений Вигнера. Разработка метода функциональной редукции для двухпетлевых Фейнмановских интегралов и его применение для вычисления интегралов, соответствующих диаграммам с четырьмя и пятью внешними линиями.

Ожидаемые результаты за весь срок реализации проекта

По разделу I.

Разработка метода, комплекса программ и расчет с их помощью сечений глубоко подбарьерных реакций слияния\деления тяжелых ядер в условиях сильной связи каналов на основе численного решения соответствующей системы уравнений Шредингера с асимптотическими граничными условиями.

Исследование структуры легких и тяжелых ядер с нейтронным гало на основе расчета характеристик ядро-ядерных и протон-ядерных взаимодействий в рамках модифицированной модели микроскопического оптического потенциала.

Создание пакета программ для реалистичного описания изотопных и скоростных распределений реакций фрагментации тяжелых ионов при средних энергиях в рамках транспортно-статистического подхода.

Построение и программная реализация стохастической модели, обеспечивающей количественное описание химических реакций с участием тяжелых и сверхтяжелых элементов в хроматографических экспериментах ЛЯР.

Численное исследование динамики спиновых систем и холодных атомов в ловушках в рамках квантово-механической модели на основе решения системы нелинейных уравнений с использованием оптимизированного метода автомодельных приближений.

По разделу II.

Разработка вычислительных схем и комплексов программ, реализующих решение систем уравнений в рамках континуально-атомистических моделей взаимодействия облучающего пучка заряженных частиц с материалом мишени. Получение методами математического моделирования новой информации о динамике формирования дефектных структур под действием облучения.

Получение новой информации о формировании, структуре и свойствах фосфолипидных объектов различного типа (везикул, бицелл) методами классической и квантовой молекулярной динамики и на основе метода разделенных формфакторов. В том числе, моделирование взаимодействия бета-амилоидных и антимикробных пептидов с системой фосфолипидных мембран.

Исследование сложных процессов в джозефсоновских и спиновых наноструктурах в зависимости от конфигурации изучаемых систем и характера внешних воздействий с целью оценки влияния различных факторов на физические характеристики и динамику сверхпроводящих процессов.

Разработка и использование информационно-вычислительной среды на базе JupyterHub для комфортной и унифицированной работы с моделями сверхпроводящих структур.

Разработка методов и исследование процессов формирования и свойств локализованных структур в конденсированных средах, описываемых различными типами нелинейных уравнений теории поля. Моделирование гидратации электрона в рамках динамической

модели полярона, модифицированной для исследования влияния различных факторов на этот процесс.

По разделу III.

Разработка, программная реализация и тестирование смешанных формулировок задач магнитостатики на основе магнитного векторного и полного скалярного потенциалов, а также на основе объемных интегральных уравнений с кусочно-полиномиальной аппроксимацией намагниченности в пределах конечного элемента.

Адаптация и тестирование комбинированного метода конечных и граничных элементов для 3D моделирования магнитных систем со сложной геометрией и нелинейной намагниченностью. Адаптация пакета COMSOL Multiphysics® на ресурсах МИВК для реализации этих методов.

Разработка методов повышения эффективности и оптимизации численного моделирования сложных магнитных систем ускорителей, включая разработку масштабируемых алгоритмов с высоким потенциалом параллелизма.

Проведение расчетов, направленных на исследование влияния разных факторов и оптимизацию режима работы циклотрона MSC230. В том числе, анализ частот бетатронных колебаний и фазового движения частиц в различных вариантах компьютерных моделей и при формировании магнитного поля циклотрона MSC230

По разделу IV.

Методы верификации результатов компьютерного моделирования сложных процессов в плотной ядерной материи на основе данных наблюдений за компактными звёздами и экспериментальных данных по соударениям тяжелых ионов, реализующие байесовские подходы для оценки свободных параметров моделируемых процессов.

Методы и программы для моделирования процессов в сильно взаимодействующей горячей и плотной ядерной материи, возникающей в соударениях тяжелых ионов при энергиях NICA, включая процессы рассеяния и рождения частиц и образование кварк-глюонной плазмы.

Создание единой информационно-вычислительной среды для унифицированной работы с разными моделями уравнения состояния, включая проведение интерактивных расчетов механических характеристик нейтронных звезд на основе уравнения состояния холодного и плотного вещества.

Получение численных результатов, актуальных для понимания фундаментальных процессов в моделируемых системах.

По разделу V.

Развитие методов, сочетающих проблемно-ориентированное квантовое программирование и методы вычислительной математики, для получения новой информации о квантовых системах различной природы.

Разработка новых и адаптация существующих квантовых симуляторов для высокопроизводительных вычислений на компьютерах гибридной архитектуры; применение квантового программирования для моделирования квантовых вычислений и для решения ряда задач физики конденсированного состояния, физики высоких энергий, квантовой химии, искусственного интеллекта и др.

Разработка новых подходов для исследования квантовых систем на основе интеграции методов вычислительной физики, методов квантовой теории информации, гибридных методов квантово-классического программирования компьютерной математики и символьно-численных алгоритмов. Исследование на этой основе информационных характеристик и описание динамики квантовых состояний в физике элементарных частиц и ядер, квантовой химии, биофизике и др.

Исследование и классификация информационных характеристик состояний конечномерных квантовых систем в представлении фазового пространства квантовой теории для определения наиболее важных характеристик, необходимых для моделирования квантовых систем различных классов и для повышения эффективности квантовых вычислений.

Научный задел и оценка рисков невыполнения проекта

Участники проекта обладают высокой квалификацией в области вычислительной физики и современных информационных технологий, имеют значительный опыт разработки методов и программ для исследования сложных физических систем, а также успешного проведения высокопроизводительного компьютерного моделирования. В состав исследовательского коллектива входят увлеченные молодые ученые и инженеры, а также опытные ученые, известные своими достижениями в области разработки методов вычислений и математического моделирования. В числе участников проекта 30 кандидатов и 13 докторов наук. Благодаря регулярно проводимым в ЛИТ ОИЯИ совещаниям, школам, практикам, семинарам, молодые специалисты имеют возможность повышать свой научный уровень и ИТ-квалификацию, необходимые для успешного решения задач проекта. В 2020–2022 гг. сотрудниками Научного отдела вычислительной физики ЛИТ ОИЯИ в сотрудничестве с коллегами из других лабораторий и зарубежных научных центров подготовлено более 150 публикаций в реферируемых научных изданиях по тематике проекта, в диссертационном совете ЛИТ успешно защищены три кандидатские диссертации сотрудников ЛИТ по тематике проекта. В библиотеку электронных программ JINRLIB в 2022 году сотрудниками НОВФ ЛИТ переданы 4 программы, реализующие методы высокопроизводительного численного исследования и 2 прикладных программы оформлены для международной библиотеки компьютерных программ журнала Computer Physics Communications. Таким образом, с учетом имеющегося у коллектива участников проекта научного задела есть все основания полагать, что задачи проекта будут успешно выполнены.

В качестве факторов риска отметим следующие.

- Поскольку исследования в рамках проекта тесно увязаны с исследованиями, проводимыми в других лабораториях ОИЯИ, существенное изменение исследовательских планов в подразделениях ОИЯИ может привести к неполному выполнению задач данного проекта.
- Негативное влияние на успешную реализацию задач проекта могут оказать ограничения в доступе к лицензированному программному обеспечению и к высокопроизводительным вычислительным ресурсам.
- Форс-мажорные обстоятельства, в том числе связанные с возможными осложнениями геополитической обстановки и ограничительными мерами в период эпидемий, также могут препятствовать успешному решению задач проекта в полном объеме.

2.3. Предполагаемый срок выполнения

2024-2026 гг.

2.4. Участвующие лаборатории ОИЯИ

ЛИТ

Сотрудничество с другими лабораториями:

ЛТФ (Гнатич М., Донков А.А., Лукьянов В.К., Фризен А.В., Юкалов В.И., Виницкий С.И., Юшанхай В.Ю., Низмитдинов Р.Г, Шукринов Ю.М., Рахронов И.Р.)

ЛЯП (Карамышев О.В., Карамышева Г.А., Киян И.Н.)

ЛНФ (Перепелкин Е.Е., Попов Е.П., Кучерка Н., Киселев М.А.)

ЛЯР (Карпов А.В., Самарин В.В., Батчулуун Э., Середа Ю.М., Мирзаев М.Н.)

ЛРБ (Бугай А.Н., Чижов А.В.)

2.4.1. Потребности в ресурсах МИВК

Вычислительные ресурсы	Распределение по годам				
	1 год	2 год	3 год		
Хранение данных (ТБ) - EOS - Ленты					
Tier 1 (ядро-час)					
Tier 2 (ядро-час)					
СК «Говорун» (ядро-час) - CPU - GPU	300000 80000000	300000 80000000	300000 80000000		
Облака (CPU ядер)					

2.5. Участвующие страны, научные и научно-образовательные организации

Организация	Страна	Город	Участники	Тип соглашения
ННЛА	Армения	Ереван	Ананикян Н., Пилюян А.	совместные работы
БрГУ	Беларусь	Брест	Кац Б.П.	совместные работы
ИМ НАНБ	Беларусь	Минск	Егоров А.Д., Малютин В.Б.	соглашение
SU	Болгария	София	Христов И.Г., Христова Р.Д., Младенов Д.	совместные работы
TSU	Грузия	Тбилиси	Элашвили А. Гиоргадзе Г.	совместные работы
UG	Грузия	Тбилиси	Гогилидзе С.	совместные работы
CU	Египет	Гиза	Абдул-Магеад И.	совместные работы
CIAE	Китай	Пекин	Ченгжан Лин, Пэйвэй Вэн	совместные работы
UNAM	Мексика	Мехико	Петер О. Гесс	совместные работы
IMDT MAS	Монголия	Улан-Батор	Батгэрэл Б.	совместные работы
Коллаборация BM@N	Россия	Дубна	Капишин М.Н.	совместные работы
Коллаборация MPD	Россия	Дубна	Рябов В.Г.	совместные работы
РНТОРЭС	Россия	Москва	Егоров А.А.	совместные работы

РУДН	Россия	Москва	Севастьянов Л.А., Бронников К.А., Рыбаков Ю.П.	совместные работы
ИМПБ РАН	Россия	Пушино	Лахно В.Д.	совместные работы
СГУ	Россия	Саратов	Дербов В.Л.	совместные работы
УСТ	ЮАР	Кейптаун	Алексеева Н.	совместные работы, грант программы JINR-NRF

2.6. Организации-соисполнители (*те сотрудничающие организации/партнеры, без финансового, инфраструктурного участия которых выполнение программы исследований по теме невозможно. Пример — участие ОИЯИ в экспериментах LHC в CERN*).

3. Кадровое обеспечение

3.1. Кадровые потребности в течение первого года реализации

№№ п/п	Категория работника	Основной персонал, сумма FTE	Ассоциированный персонал, сумма FTE
1.	научные работники	43.7	3
2.	инженеры	5.5	
3.	руководители	0.8	
	Итого:	50	3

3.2. Доступные кадровые ресурсы

3.2.1. Основной персонал ОИЯИ – общее количество участников

№№ п/п	Категория работника	Основной персонал, сумма FTE	Ассоциированный персонал, сумма FTE
1.	научные работники	40.90 (51 чел.)	
2.	инженеры	5.35 (9 чел.)	
3.	руководители	0.8 (1 чел.)	
	Итого:	47.05 (61 чел.)	

№ п/п	Категория работников (научные работники, инженеры, специалисты, рабочие)	ФИО	Подразде- ление ЛИТ	Должность	Ученая степень
----------	--	-----	------------------------	-----------	-------------------

1.	научный работник	Буша Я. (ст.)	Руководство	зам. дир. лаб.	к.ф.-м.н.
2.	научный работник	Чулуунбаатар О.	Руководство	зам. дир. лаб.	д.ф.-м.н.
3.	научный работник	Пузынин И.В.	Руководство	сов. при дир. лаб.	д.ф.-м.н.
4.	научный работник	Акишин П.Г.	НОВФ	зам. нач. отдела	д.ф.-м.н.
5.	научный работник	Айриян А.С.	НОВФ	нач. сектора	к.ф.-м.н.
6.	научный работник	Амирханов И.В.	НОВФ	нач. сектора	к.ф.-м.н.
7.	научный работник	Земляная Е.В.	НОВФ	нач. сектора	д.ф.-м.н.
8.	научный работник	Хведелидзе А.	НОВФ	нач. сектора	к.ф.-м.н.
9.	научный работник	Подгайный Д.В.	ВКиРИС	нач. сектора	к.ф.-м.н.
10.	научный работник	Калиновский Ю.Л.	НОВФ	гнс	д.ф.-м.н.
11.	научный работник	Саха Б.	НОВФ	внс	д.ф.-м.н.
12.	научный работник	Пузынина Т.П.	НОВФ	внс	д.ф.-м.н.
13.	научный работник	Сердюкова С.И.	НОВФ	внс	д.ф.-м.н.
14.	научный работник	Ширикова Н.Ю.	НОВФ	внс	к.ф.-м.н.
15.	научный работник	Юкалова Е.П.	НОВФ	внс	к.ф.-м.н.
16.	научный работник	Червяков А.М.	НОВФ	внс	к.ф.-м.н.
17.	научный работник	Ямалеев Р.М.	НОВФ	внс	к.ф.-м.н.
18.	научный работник	Гусев А.А.	НОВФ	внс	д.ф.-м.н.
19.	научный работник	Корняк В.В.	НОВФ	внс	д.ф.-м.н.
20.	научный работник	Никонов Э.Г.	ВКиРИС	внс	д.ф.-м.н.
21.	научный работник	Лукьянов К.В.	НОВФ	снс	к.ф.-м.н.
22.	научный работник	Буша Я. (мл.)	НОВФ	снс	к.ф.-м.н.
23.	научный работник	Григорян О.	НОВФ	снс	к.ф.-м.н.
24.	научный работник	Полякова Р.В.	НОВФ	снс	к.ф.-м.н.
25.	научный работник	Юлдашев О.И.	НОВФ	снс	д.ф.-м.н.
26.	научный работник	Кулябов Д.С.	НОВФ	снс	д.ф.-м.н.
27.	научный работник	Карамышева Т.В.	НОВФ	снс	к.ф.-м.н.

28.	научный работник	Сархадов И.	НОВФ	снс	к.ф.-м.н.
29.	научный работник	Шарипов З.А.	НОВФ	снс	к.ф.-м.н.
30.	научный работник	Барашенков И.В.	НОВФ	снс	к.ф.-м.н.
31.	научный работник	Воскресенская О.О.	НОВФ	снс	к.ф.-м.н.
32.	научный работник	Махалдиани Н.В.	НОВФ	снс	к.ф.-м.н.
33.	научный работник	Михайлова Т.И.	НОВФ	снс	к.ф.-м.н.
34.	научный работник	Юлдашева М.Б.	НОВФ	снс	к.ф.-м.н.
35.	научный работник	Абгарян В.	НОВФ	снс	к.ф.-м.н.
36.	научный работник	Боголюбская А.А.	НОВФ	снс	к.ф.-м.н.
37.	научный работник	Буреш М.	НОВФ	снс	к.ф.-м.н.
38.	научный работник	Палий Ю.	НОВФ	снс	к.ф.-м.н.
39.	научный работник	Тарасов О.В.	НОВФ	снс	к.ф.-м.н.
40.	научный работник	Янович Д.А.	НОВФ	снс	к.ф.-м.н.
41.	научный работник	Стрельцова О.И.	ВКиРИС	снс	к.ф.-м.н.
42.	научный работник	Сюракшина Л.А.	НТО ПИО	снс	к.ф.-м.н.
43.	научный работник	Тухлиев З.К.	НОВФ	нс	б/с
44.	научный работник	Зуев М.И.	ВКиРИС	нс	б/с
45.	научный работник	Башашин М.Б.	НОВФ	мнс	б/с
46.	научный работник	Волохова А.В.	НОВФ	мнс	к.ф.-м.н.
47.	научный работник	Торосян А.Г.	НОВФ	мнс	б/с
48.	научный работник	Бутенко Ю.А.	ВКиРИС	мнс	б/с
49.	научный работник	Чулуунбаатар Г.	НОВФ	стаж.-исслед.	б/с
50.	научный работник	Бадреева Д.Р.	ВКиРИС	стаж.-исслед.	б/с
51.	научный работник	Папоян В.В.	ВКиРИС	стаж.-исслед.	б/с

52.	инженер	Рахмонова А.Р.	ВКиРИС	инж.-прогр.	б/с
53.	инженер	Рогожин И.А.	НОВФ	инж.-прогр.	б/с
54.	инженер	Годеридзе Д.	ВКиРИС	инж.-прогр.	б/с
55.	инженер	Нечаевский А.В.	ВКиРИС	вед. прогр.	к.т.н
56.	инженер	Рапортиренко А.М.	НОВФ	вед. прогр.	б/с
57.	инженер	Рихвицкий В.С.	НТО ПИО	вед. прогр.	б/с
58.	инженер	Чулуунбаатар Х.	НОВФ	лаборант	б/с
59.	инженер	Мавлонбердиева С.Д.	НОВФ	лаборант	б/с
60.	инженер	Папоян Г.В.	ВКиРИС	лаборант	б/с
61.	руководители	Айрян Э.А.	Руководство	пом. дир. лаб.	к.ф.-м.н.
	Итого:				47.05

3.2.2. Ассоциированный персонал ОИЯИ

№№ п/п	Категория работников	Организация-партнер	Сумма FTE
1.	научные работники		
2.	инженеры		
	Итого:		

4. Финансовое обеспечение

4.1. Полная сметная стоимость проекта

Прогноз полной сметной стоимости (указать суммарно за весь срок, за исключением ФЗП). Детализация приводится в отдельной форме.

4.2. Внебюджетные источники финансирования

Предполагаемое финансирование со стороны соисполнителей/заказчиков — общий объем.

Руководители проекта _____/_____/

_____/_____/

Дата представления проекта в ДНОД _____

Дата решения НТС Лаборатории _____, номер документа _____

Год начала проекта – 2024

Предлагаемый план-график и необходимые ресурсы для осуществления Проекта

Наименования затрат, ресурсов, источников финансирования		Стоимость (тыс. долл.) потребность и в ресурсах	Стоимость, распределение по годам				
			1 год	2 год	3 год		
	Международное сотрудничество (МНТС)	270	90	90	90		
	Материалы						
	Оборудование и услуги сторонних организаций	173,3	60	57,8	55,5		
	Пуско-наладочные работы						
	Услуги научно-исследовательских организаций						
	Приобретение программного обеспечения	150	45	50	55		
	Проектирование/строительство						
	Сервисные расходы (планируются в случае прямой принадлежности к проекту)						
Необходимые ресурсы	Нормо-час	Ресурсы					
		– сумма FTE,					
		– ускорителя/установки,					
		– реактора,.....					
Источники финансирования	Бюджетные средства	593,3	195	197,8	200,5		
	Внебюджет (доп. смета)	Вклады соисполнителей Средства по договорам с заказчиками Другие источники финансирования					

Руководители проекта

_____ / _____ /

_____ / _____ /

Экономист Лаборатории

_____ / _____ /

ЛИСТ СОГЛАСОВАНИЙ ПРОЕКТА

НАИМЕНОВАНИЕ ПРОЕКТА

Методы вычислительной физики для исследования сложных систем

УСЛОВНОЕ ОБОЗНАЧЕНИЕ ПРОЕКТА

ШИФР ПРОЕКТА

ШИФР ТЕМЫ 05-6-1119-2014/...

ФИО РУКОВОДИТЕЛЯ ПРОЕКТА Чулуунбаатар О., Земляная Е.В.

СОГЛАСОВАНО

ВИЦЕ-ДИРЕКТОР ИНСТИТУТА

подпись

ФИО

ДАТА

ГЛАВНЫЙ УЧЕНЫЙ СЕКРЕТАРЬ
ИНСТИТУТА

подпись

ФИО

ДАТА

ГЛАВНЫЙ ИНЖЕНЕР

подпись

ФИО

ДАТА

ДИРЕКТОР ЛАБОРАТОРИИ

подпись

ФИО

ДАТА

ГЛАВНЫЙ ИНЖЕНЕР ЛАБОРАТОРИИ

подпись

ФИО

ДАТА

УЧЕНЫЙ СЕКРЕТАРЬ ЛАБОРАТОРИИ

подпись

ФИО

ДАТА

РУКОВОДИТЕЛЬ ТЕМЫ / КИП

подпись

ФИО

ДАТА

подпись

ФИО

ДАТА

РУКОВОДИТЕЛИ ПРОЕКТА

подпись

ФИО

ДАТА

подпись

ФИО

ДАТА

ОДОБРЕН ПКК ПО НАПРАВЛЕНИЮ

подпись

ФИО

ДАТА